

©1994 г.

ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ДЛЯ ДВУХ ВЗАИМОСВЯЗАННЫХ УРОВНЕЙ ПРИЛИПАНИЯ

Л.И. Филина, В.А. Маргулис

Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева,

430000, Саранск, Россия

(Получена 7 октября 1993 г. Принята к печати 17 марта 1994 г.)

Рассматривается система кинетических уравнений, описывающих термостимулированную проводимость в случае двух уровней прилипания. Получена формула для проводимости при одновременном учете взаимного влияния таких уровней независимо от их различия по энергии для случая быстрого повторного захвата носителя.

Как известно, изучение термостимулированной проводимости (ТСП) позволяет определить ряд параметров локальных энергетических центров в полупроводниках. Экспериментальная кривая ТСП $\sigma(T)$ представляет собой один или несколько более или менее разрешенных пиков, каждый из которых соответствует освобождению электронов с центров захвата определенной энергии. Теоретическое исследование кинетики ТСП, описанное в [1], основано на том предположении, что максимумы этой кривой расположены достаточно далеко друг от друга, так, что заполнение всех остальных уровней, кроме рассматриваемого, остается неизменным. В [2] отмечается, однако, что численное интегрирование предложенной в [1] системы кинетических уравнений для случая двух близких по энергии уровней прилипания дает смещение пиков и изменение их относительной амплитуды по сравнению с этими же пиками, рассчитанными для каждого уровня в отдельности, без учета другого. Такие различия могут быть вызваны тем, что эффективное время рекомбинации при опустошении одного типа ловушек зависит от параметров других ловушек, т.е. пренебрегать их взаимным влиянием друг на друга при термическом освобождении не всегда представляется возможным.

Нами получена формула, описывающая ТСП при одновременном учете двух уровней прилипания независимо от их различия по энергии. Проведенное теоретическое исследование кинетики ТСП для такого случая основано на предположениях, что вкладом в ток электронов, освобождаемых со всех, кроме двух рассматриваемых, уровней,

можно пренебречь и что заполнение всех других уровней остается неизменным. Аналогичные условия использованы и в [1], только относятся они к одному уровню прилипания.

Общая система кинетических уравнений, описывающих ТСП, имеет вид [1]

$$\begin{cases} \frac{dn_i}{dt} = -n_i N_c \sigma_i v_T \exp\left(-\frac{\Delta E_i}{kT}\right) + n(N_i - n_i)\sigma_i v_T, \\ \frac{dn}{dt} = -\frac{n}{\tau} - \sum_i \frac{dn_i}{dt}, \end{cases} \quad (1)$$

где n_i — концентрация электронов на i -м примесном уровне с энергией ионизации ΔE_i , n — концентрация электронов в зоне проводимости, N_c — эффективная плотность состояний в зоне проводимости, τ — постоянная времени рекомбинации электронов, N_i — концентрация i -х центров, σ_i — их сечения захвата. С учетом указанных выше условий, а также используемых в [1] неравенств система (1) для двух уровней примет вид

$$\begin{cases} \frac{dn_1}{dt} = -n_1 N_c \sigma_1 v_T \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right) + n N_1 \sigma_1 v_T, \\ \frac{dn_2}{dt} = -n_2 N_c \sigma_2 v_T \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right) + n N_2 \sigma_2 v_T, \\ n = -\tau \left(\frac{dn_1}{dt} + \frac{dn_2}{dt} \right). \end{cases} \quad (2)$$

Из (2) нетрудно получить

$$\begin{aligned} & (1 + \tau N_1 \sigma_1 v_T + \tau N_2 \sigma_2 v_T) \frac{dn_1}{dt} = \\ & = -N_c n_1 \sigma_1 v_T (1 + \tau N_2 \sigma_2 v_T) \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right) + n_2 \sigma_1 \sigma_2 v_T^2 N_1 N_c \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right), \\ & (1 + \tau N_1 \sigma_1 v_T + \tau N_2 \sigma_2 v_T) \frac{dn_2}{dt} = \\ & = -N_c n_2 \sigma_2 v_T (1 + \tau N_1 \sigma_1 v_T) \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right) + n_1 \sigma_1 v_T^2 N_2 N_c \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right). \end{aligned} \quad (3)$$

Таким образом, имеем систему связанных дифференциальных уравнений. Введем новую переменную $x = n_2/n_1$ и перейдем от переменных (n_1, n_2) к переменным (n_1, x) . Кроме того для удобства записи обозначим $\nu_i = \tau N_i \sigma_i v_T$, где $i = 1, 2$. Тогда вместо (3) получим новую систему уравнений:

$$\begin{aligned} & (1 + \nu_1 + \nu_2) \frac{x}{n_1} \frac{dn_1}{dt} = \\ & = -N_c \sigma_1 v_T (1 + \nu_2) x \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right) + x^2 \nu_1 N_c \sigma_2 v_T \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right), \end{aligned}$$

$$(1 + \nu_1 + \nu_2) \left(\frac{x}{n_1} \frac{dn_1}{dt} + \frac{dx}{dt} \right) = -N_c \sigma_2 v_T x (1 + \nu_1) \exp \left(-\frac{\Delta E_2}{kT} \right) + \nu_2 N_c \sigma_1 v_T \exp \left(-\frac{\Delta E_1}{kT} \right). \quad (4)$$

Система уравнений (4) позволяет развязать переменные. Действительно, вычитая из второго уравнения (4) первое, получим новое уравнение, не содержащее переменной n_1 :

$$(1 + \nu_1 + \nu_2) \frac{dx}{dt} = N_c \sigma_1 v_T (x + x\nu_2 + \nu_2) \exp \left(-\frac{\Delta E_1}{kT} \right) - N_c \sigma_2 v_T x (1 + \nu_1 + x\nu_1) \exp \left(-\frac{\Delta E_2}{kT} \right). \quad (5)$$

Обозначив

$$a(t) = \frac{N_c \sigma_2 \nu_1 v_T}{1 + \nu_1 + \nu_2} \exp \left(-\frac{\Delta E_2}{kT} \right),$$

$$b(t) = \frac{N_c v_T}{1 + \nu_1 + \nu_2} \left[\sigma_1 (1 + \nu_2) \exp \left(-\frac{\Delta E_1}{kT} \right) - \sigma_2 (1 + \nu_1) \exp \left(-\frac{\Delta E_2}{kT} \right) \right],$$

$$c(t) = \frac{N_c \sigma_1 \nu_2 v_T}{1 + \nu_1 + \nu_2} \exp \left(-\frac{\Delta E_1}{kT} \right), \quad (6)$$

уравнение (5) можно переписать в виде

$$\frac{dx}{dt} = -a(t)x^2 + b(t)x + c(t). \quad (7)$$

Уравнение (7) является уравнением Риккати, которое, как известно из теории дифференциальных уравнений 1-го порядка, не интегрируется аналитически в общем случае. Однако в приближении быстрого повторного захвата, т.е. при $\nu_i \gg 1$, единицей в (6) по сравнению с ν_i можно пренебречь, и тогда $b \approx c - a$. В этом случае уравнение (7) примет вид

$$\frac{dx}{dt} = -ax^2 + (c - a)x + c. \quad (8)$$

Запишем (8) как

$$\frac{dx}{dt} = -a(t)(x + 1)x + (x + 1)c(t). \quad (9)$$

Введем новую переменную $y = (x + 1)^{-1}$, тогда выражение (9) преобразуется к виду

$$\frac{dy}{dt} = a(t) - [a(t) + c(t)]y. \quad (10)$$

Решение (10) запишем следующим образом:

$$y = \left\{ C_0 + \int_{t_0}^t a \exp \left(\int_{t_0}^t [a(\tau) + c(\tau)] d\tau \right) dt \right\} / \exp \int_{t_0}^t [a(t) + c(t)] dt, \quad (11)$$

где C_0 — константа интегрирования. Из (11) находим

$$x = \exp \frac{1}{\beta} \int_{T_0}^T [a(T) + c(T)] dT / \left\{ C_0 + \frac{1}{\beta} \int_{T_0}^T a(T) \left(\exp \frac{1}{\beta} \int_{T_0}^T [a(\tau) + c(\tau)] d\tau \right) dT \right\} - 1. \quad (12)$$

Здесь $T(t) = T_0 + \beta t$, где β — скорость нагрева. Полагая $x_0 = x(T_0) = n_2^0/n_1^0$, найдем константу интегрирования $C_0 = n_1^0/(n_1^0 + n_2^0)$, где n_1^0 и n_2^0 — начальные концентрации заполнения уровней прилипания. Тогда

$$x = \frac{\exp \frac{1}{\beta} \int_{T_0}^T [a(T) + c(T)] dT}{\left\{ \frac{n_1^0}{n_1^0 + n_2^0} + \frac{1}{\beta} \int_{T_0}^T dT a(T) \exp \frac{1}{\beta} \int_{T_0}^T [a(\tau) + c(\tau)] d\tau \right\} - 1}. \quad (13)$$

Таким образом, (13) — интеграл уравнения (7) в приближении быстрого повторного захвата.

На рис. 1, 2 приведены результаты численного решения уравнения (7) (полагаем $\sigma \sim T^{-2}$, $\tau = \text{const}$) для уровней захвата с энергиями 0.3 и 0.4 эВ. На рис. 1, a, b показаны зависимости амплитуды и положения

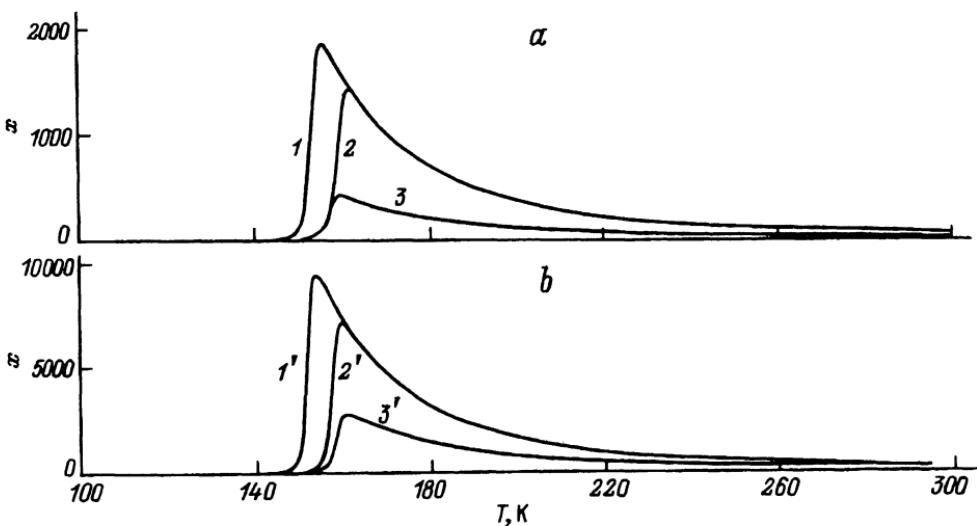


Рис. 1. Зависимости $x(T)$ согласно (7); $x_0 = 1$. a: 1 — $\beta = 0.2 \text{ K/c}$, $\nu_1 = \nu_2$; 2 — $\beta = 0.5 \text{ K/c}$, $\nu_1 = \nu_2$; 3 — $\beta = 0.2 \text{ K/c}$, $\nu_1 = 0.2\nu_2$; $\nu_1 = 14.599$. b: 1' — $\beta = 0.2 \text{ K/c}$, $\nu_1 = 14.599$, $\nu_1 = 5\nu_2$; 2' — $\beta = 0.5 \text{ K/c}$, $\nu_1 = 14.599$, $\nu_1 = 5\nu_2$; 3' — $\beta = 0.5 \text{ K/c}$, $\nu_1 = 1.4599$, $\nu_1 = \nu_2$. Значения x_0 и ν_1 соответствуют $T = 120 \text{ K}$.

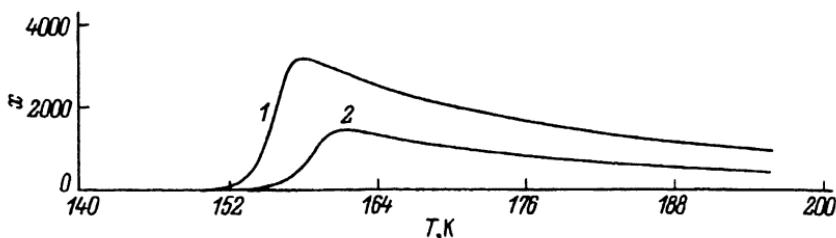


Рис. 2. Зависимости $x(T)$ согласно (8); $x_0 = 1$, $\beta = 0.5 \text{ К/с}$, $\nu_2 = \nu_1$; ν_1 : 1 — 1.4599, 2 — 14.599. Значения x_0 и ν_1 соответствуют $T = 120 \text{ К}$.

максимума кривых $x(T)$ от скорости нагрева при $\nu_1 \neq \nu_2$ (кривые 3, 1' и 2') и при $\nu_1 = \nu_2$ (кривые 1, 2 и 3'). При этом кривые 1, 2, 1' и 2' соответствуют условию быстрого ($\nu \gg 1$), а 3' медленного ($\nu \sim 1$) повторного захвата. Для кривой 3 скорости повторного захвата различны для разных уровней: $\nu_1 \gg 1$, $\nu_2 \sim 1$.

На рис. 2 приведены кривые $x(T)$, рассчитанные в приближении, соответствующем уравнению (8). Нижняя кривая 2 на рис. 2 рассчитывалась для случая $\nu_1 = \nu_2 \simeq 10$. Эта кривая совпадает с кривой 2 на рис. 1, a, рассчитанной по точному решению уравнения (7), что подтверждает правомерность такого приближения для быстрого повторного захвата. Верхняя кривая 1 на рис. 2, соответствующая условию $\nu_1 = \nu_2 \simeq 1$, не совпадает с кривой 3' на рис. 1, b, рассчитанной по точному решению уравнения (7), ни по положению, ни по амплитуде пика.

На рис. 3 кривая 1 построена по формуле (13), а кривая 2 соответствует тем же параметрам расчета и получена при численном решении уравнения (7) для случая $\nu_1 \simeq \nu_2 \simeq 1$. Видно, что максимум кривой 2 смещен в сторону высоких температур, а амплитуда пика меньше. В области более высоких температур обе кривые практически совпадают. Отсюда следует, что аналитическое решение (13) остается в силе и в случае слабого повторного захвата, за исключением области температур в окрестности первого пика. В приближении быстрого повторного захвата, если для простоты считать все параметры уровней, кроме энергии, одинаковыми, зависимость $x(T)$ определяется только двумя параметрами — энергией ΔE_i и сечением захвата σ_i .

Зная $x(T)$, можно получить решение первого из уравнений системы (4). Для этого перепишем его в виде

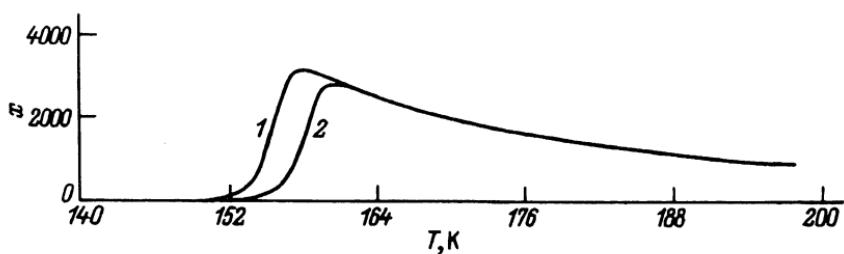


Рис. 3. Зависимости $x(T)$ в приближении медленного повторного захвата. 1 — расчет по формуле (13), 2 — решение уравнения (7). Параметры расчета: $\beta = 0.5 \text{ К/с}$, $\nu_1 = 1.4599$, $\nu_2 = \nu_1$, $x_0 = 1$; значения x_0 и ν_1 соответствуют $T = 120 \text{ К}$.

$$\frac{d(\ln n_1)}{dt} = \frac{N_c v_T}{1 + \nu_1 + \nu_2} \left[x \nu_1 \sigma_2 \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right) - \sigma_1 (1 + \nu_2) \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right) \right]. \quad (14)$$

Интегрируя (14), получим

$$n_1 = n_1^0 \exp \left\{ \frac{1}{\beta} \int_{T_0}^T \frac{N_c v_T}{1 + \nu_1 + \nu_2} \left[x \nu_1 \sigma_2 \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right) - \sigma_1 (1 + \nu_2) \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right) \right] dt \right\}. \quad (15)$$

Для случая быстрого повторного захвата (15) преобразуется к виду

$$n_1 = n_1^0 \exp \left\{ \frac{1}{\beta} \int_{T_0}^T \frac{N_c v_T}{\nu_1 + \nu_2} \left[x \nu_1 \sigma_2 \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right) - \sigma_1 \nu_2 \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right) \right] dt \right\}, \quad (16)$$

где $x(T)$ определяется выражением (13).

Итак, в приближении быстрого повторного захвата система уравнений (2) допускает аналитическое решение. Складывая два первых уравнения этой системы и подставляя $\frac{dn_1}{dt} + \frac{dn_2}{dt}$ в третье, получим

$$n = \frac{\tau N_c v_T n_1}{1 + \nu_1 + \nu_2} \left[\sigma_1 \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right) + \sigma_2 x \left(-\frac{\Delta E_2}{kT} \right) \right], \quad (17)$$

что в приближении быстрого повторного захвата примет вид

$$n = \frac{\tau N_c v_T n_1}{\nu_1 + \nu_2} \left[\sigma_1 \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right) + x \sigma_2 \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right) \right]. \quad (18)$$

Величина термостимулированной проводимости определяется выражением

$$\sigma = \frac{e \mu_n \tau N_c v_T n_1}{\nu_1 + \nu_2} \left[\sigma_1 \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right) + x \sigma_2 \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right) \right], \quad (19)$$

где значения x и n_1 даны формулами (13) и (16), e — заряд и μ_n — подвижность электрона.

Видно, что при выполнении условия

$$n_1 \sigma_1 \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right) \gg n_2 \sigma_2 \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right) \quad (20)$$

(здесь $\Delta E_2 > \Delta E_1$) формула (19) коррелирует с результатом, приведенным в [1] для одного уровня захвата. Напротив, если критерий (20) не выполняется, то такие уровни следует считать близкими по энергии и пренебрегать их взаимным влиянием при термостимулированном опустошении нельзя.

Анализ выражения (15) показывает, что если, используя критерий (20), пренебречь первым членом в квадратных скобках, то остается дополнительный член $-\sigma_1 \nu_2 \exp(\Delta E_1/kT)$ по сравнению с аналогичным

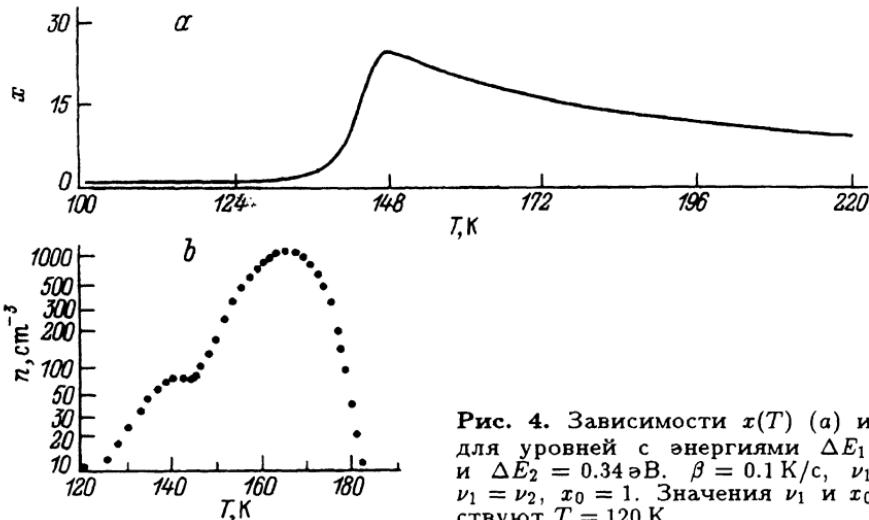


Рис. 4. Зависимости $x(T)$ (а) и $n(T)$ (б) для уровней с энергией $\Delta E_1 = 0.30$ эВ и $\Delta E_2 = 0.34$ эВ. $\beta = 0.1$ К/с, $\nu_1 = 14.599$, $\nu_1 = \nu_2$, $x_0 = 1$. Значения ν_1 и x_0 соответствуют $T = 120$ К.

выражением, записанным для одного уровня (т.е. при $\nu_2 = 0$ и $x = 0$). Этот дополнительный член описывает повторный захват электронов, освобождаемых с более мелкого уровня на глубокий. За счет этого отрицательного члена уменьшается величина n_1 , что приводит к уменьшению амплитуды первого пика на кривой ТСП. Этот вывод, вытекающий из полученного в работе результата, согласуется с предлагаемым в [2] объяснением подобного уменьшения амплитуды первого пика, наблюдаемого при численном расчете ТСП для одного и для двух уровней захвата.

На рис. 4,а приведена зависимость $x(T)$ для уровней 0.30 и 0.34 эВ при скорости нагрева $\beta = 0.1$ К/с и $\nu_1 = \nu_2 \sim 10$, а на рис. 4,б показана зависимость $n(T)$, рассчитанная по формуле (17). На кривой $n(T)$ видны два максимума при температурах 142 и 168 К. Использование ТСП для определения энергии центров захвата путем сопоставления экспериментальных и теоретических кривых [3–5] основано на теории, построенной без учета взаимодействия уровней прилипания. Однако, как показано в данной работе, взаимное влияние близко лежащих уровней захвата на кривые ТСП может быть довольно сильным. В частности, если для температур 142 и 168 К рассчитать энергии ΔE_i уровней захвата так, как это делается для независимых уровней, по известной формуле [2], получается значения $\Delta E_1 = 0.290$ эВ и $\Delta E_2 = 0.346$ эВ. Разность этих значений $\Delta E_2 - \Delta E_1$ на 40% отличается от исходных данных.

Кроме того, кривыми ТСП часто пользуются для оценки концентрации электронов на центрах захвата или самих центров по площади, охватываемой соответствующими пиками ТСП [3]. Как следует из приведенных выше результатов, в случае близко лежащих уровней такая оценка может не соответствовать действительности. Так, из рис. 4,б видно, что площади под первым и вторым пиками отличаются на порядок, тогда как при расчетах концентрация обоих уровней захвата и их начальное заполнение брались одинаковыми.

Список литературы

- [1] I.J. Saunders. Brit. J. Appl. Phys., **18**, 1219 (1967).
- [2] А. Милнс. *Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках* (М., Мир, 1977).
- [3] В.Н. Вертопрахов, Е.Г. Сальман. *Термостимулированные токи в неорганических веществах* (Новосибирск, Наука, 1979).
- [4] А.П. Кульсрешта, В.А. Горюнов. ФТТ, **8**, 1944 (1965).
- [5] P. Braunlich, P. Kelly. Phys. Rev. B, **1**, 1596 (1970).

Редактор Л.В. Шаронова

Thermally Stimulated Conductivity for Two Interrelated Trapping Levels

L.I.Fillina, and V.A.Margulis

N.P.Ogarev State University of Mordovia, 430000, Saransk, Russia
